

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-99-17U

Паславський В.Н.

Дослідження кореляційних функцій моделі ідеальної
фермі-системи при низьких температурах

УДК: 537.31; 538.945

PACS: 05.30.Fk

Кореляційні функції моделі ідеальної фермі-системи при низьких температурах

Паславський В.

Анотація. Запропоновано узагальнення базисного підходу в теорії електронної рідини на випадок відмінних від нуля температур шляхом розробки алгоритму розрахунку кореляційних функцій базисної системи (під базисною системою розуміємо систему невзаємодіючих ферміонів). Проведено розрахунок термодинамічних характеристик моделі електронної рідини при відмінних від нуля температурах в області слабкої неідеальності

The correlation functions for the ideal fermion system model at nonzeroth temperature

Paslavs'kii V.

Abstract. Generalization of the reference system approach in the electron liquid theory at the case of nonzeroth temperature is proposed. An algorithm for correct calculation of the correlation functions for the model of ideal fermions has been built. On this base thermodynamic characteristics of the electron liquid model have been calculated at $T \neq 0$

1. Вступ

В сучасній статистичній теорії базисний підхід є одним з потужних методів, що дозволяє досліджувати моделі, розрахунок характеристик яких неможливий аналітичними методами. По своїй суті базисний підхід - це перенормовна термодинамічна теорія збурень, сформульована в термінах бачоточастинкових характеристик (багаточастинкових кореляційних функцій) деякої простішої моделі (базисної системи). Застосування цього методу в теорії електронної рідини дало можливість детально дослідити термодинамічні, одночастинкові та динамічні характеристики даної моделі [1-5] при абсолютному нулі температури.

Природньо постає задача узагальнення базисного підходу на випадок відмінних від нуля температур. В цій роботі проводиться дослідження кореляційних функцій базисної системи $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \beta, \mu)$ в області температур низьких в порівнянні з температурою виродження $T < T_F$ ($T_F = k_B \epsilon_F^{-1}$) та застосування цього методу, в якості прикладу, для розрахунку характеристик моделі електронної рідини в області слабкої неідеальності.

2. Дослідження особливостей n -частинкових динамічних кореляційних функцій однорідних базисних систем при скінченних температурах

2.1. Означення та загальні властивості n -частинкових динамічних кореляційних функцій однорідних базисних систем

Кумулянтні кореляційні функції ідеальної базисної системи вводяться як зв'язні середні \hat{T} -добутку n -операторів густини $\hat{\rho}_x$ в спектральному представленні [1]:

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \beta, \mu) &= \beta^{-1} \langle \hat{T} \{ \hat{\rho}_{x_1} \cdots \hat{\rho}_{x_n} \} \rangle_{\mathcal{H}_\mu}^c, \quad (2.1) \\ \hat{\rho}_x &\equiv \hat{\rho}_{\mathbf{q}, \nu} = \sum_{\mathbf{k}, s, \nu^*} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}^+(\nu + \nu^*) a_{\mathbf{k}, s}(\nu^*), \\ a_{\mathbf{k}, s}(\nu^*) &= \frac{1}{\beta^{1/2}} \int_0^\beta d\beta' \exp\{-i\nu^* \beta'\} a_{\mathbf{k}, s}(\beta'), \end{aligned}$$

де $\hat{\rho}_x$ - спектральне зображення оператора електронної густини у представленні взаємодії, а оператори $a_{\mathbf{k}, s}(\beta')$ - оператори вторинного квантування в представленні взаємодії. При цьому ν і ν^* - відповідно парні та непарні частоти Мацубари [6].

Застосовуючи теорему Віка та означення спектрального представлення одночастинкової функції Гріна ідеальної системи [6]

$$-\langle \hat{T} \{ a_{\mathbf{k}_1, s_1}^+(\nu_1) a_{\mathbf{k}_2, s_2}(\nu_2) \} \rangle_{\mathcal{H}_\mu} = G_{\mathbf{k}_1, s_1}^0(\nu_1) \delta_{s_1, s_2} \delta_{\nu_1, \nu_2} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}, \quad (2.2)$$

отримуємо вираз для n -частинкової кумулянтної кореляційної функції базисної системи $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \beta, \mu)$ у вигляді згортки добутку n одночастинкових функцій Гріна ідеальної системи [1]:

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \beta, \mu) &= (-1)^{n+1} (\beta n)^{-1} \delta_{\omega_n, 0} \delta_{\tau_n, 0} \\ &\sum_{\mathbf{k}, s, \nu^*} \sum_{i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_n} \prod_{j=1}^n G_{\mathbf{k}-\tau_j}^0(\nu^* - \omega_j), \quad (2.3) \end{aligned}$$

де $\tau_n = \mathbf{q}_{i_1} + \dots + \mathbf{q}_{i_n}$, $\omega_n = \nu_{i_1} + \dots + \nu_{i_n}$, s - спінова змінна. Як бачимо з загального вигляду формули (2.3), кумулянти $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \beta, \mu)$ є симетричними функціями своїх аргументів і, крім цього, залежать від термодинамічних змінних (β, V, μ) .

У формулі (2.3) завжди мають місце рівності $\tau_n = 0$ та $\omega_n = 0$. У випадку виродження, коли $\tau_j = 0$, $\omega_j = 0$ при $j \leq n-2$ функція $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \beta, \mu)$ може бути представлена у вигляді двох доданків:

$$\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \beta, \mu) = \tilde{\mu}_{n,1}^0(x_1, \dots, x_n | \beta, \mu) + \tilde{\mu}_{n,2}^0(x_1, \dots, x_n | \beta, \mu), \quad (2.4)$$

де $\tilde{\mu}_{n,1}^0(x_1, \dots, x_n | \beta, \mu)$ - нормальна частина, а $\tilde{\mu}_{n,2}^0(x_1, \dots, x_n | \beta, \mu)$ - аномальна частина кореляційної функції (породжується власно-енергетичними діаграмами або діаграмами з вставками подібного типу, по аналогії, з нормальними та аномальними діаграмами термодинамічної теорії збурень [7,8]). В невиродженому випадку аномальні складові відсутні.

Кореляційні функції $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \beta, \mu)$ описують квантові ефекти, що зумовлені симетрією хвильової функції ідеальної системи ферміонів і зовсім не спричинені взаємодією чи структурою частинки. Найпростіший кумулянт $\tilde{\mu}_2^0(x, -x | \beta, \mu)$ - це поляризаційний оператор в наближенні хаотичних фаз. Вперше в представленні (\mathbf{q}, ν) був введений в роботі [9], а розрахований і досліджений для випадку нуля температури в роботі [10]. Вищі кумулянти $\tilde{\mu}_3^0(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, 0, 0, 0 | \mu)$, $\tilde{\mu}_4^0(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2, 0, 0, 0 | \mu)$ були розраховані для випадку нуля температури в роботах [11-13]. Аналіз загальних властивостей динамічних кумулянтів, а також розрахунок простіших з них: $\tilde{\mu}_3^0(x_1, x_2, x_3 | \mu)$, $\tilde{\mu}_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2 | \mu)$ виконано в роботах [1,14]. В цих роботах показано, що кумулянти $\tilde{\mu}_3^0(x_1, x_2, x_3 | \mu)$ та $\tilde{\mu}_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2 | \mu)$ у випадку нуля температури можуть бути представлені через елементарні функції.

Спектральне представлення одночастинкової функції Гріна невазаємодіючої системи ферміонів має вигляд [15]:

$$G_{\mathbf{k},s}^0(\nu) = \lim_{\delta \rightarrow +0} \{\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\nu\}^{-1} e^{i\delta\nu}. \quad (2.5)$$

Розпишемо добуток функцій Гріна, що входять у вираз (2.3), у вигляді суми елементарних дробів, за формулою

$$\prod_{j=1}^n G_{\mathbf{k}-\boldsymbol{\tau}_j}^0(\nu^* - \omega_j) = \sum_{j=1}^n G_{\mathbf{k}-\boldsymbol{\tau}_j}^0(\nu^* - \omega_j) \prod_{l=1}^n l \{R(l, j)\}^{-1},$$

$$R(l, j) = \varepsilon_{\mathbf{k}-\boldsymbol{\tau}_l} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\boldsymbol{\tau}_j} + i(\omega_l - \omega_j). \quad (2.6)$$

В отриманому результаті залежність від частоти ν^* міститься лише в $G_{\mathbf{k}-\boldsymbol{\tau}_j}^0(\nu^* - \omega_j)$. Використовуючи формулу

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\nu^*} G_{\mathbf{k},s}^0(\nu^*) = n_{\mathbf{k},s}^0, \quad (2.7)$$

можемо виконати підсумовування за частотою ν^* , а вираз для кореляційної функції (2.3) переписати у вигляді

$$\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \mu) = \delta_{\omega_n,0} \delta_{\boldsymbol{\tau}_n,0} \sum_{j=1}^n \gamma_n(x_1, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_n | \mu),$$

$$\gamma_n(x_1, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_n | \mu) = \frac{(-1)^n}{n} \sum_{i_1 \neq \dots \neq i_n=1}^n \times \quad (2.8)$$

$$\times \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k}-\boldsymbol{\tau}_j}^0 \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq j}}^n \{\varepsilon_{\mathbf{k}-\boldsymbol{\tau}_l} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\boldsymbol{\tau}_j} + i(\omega_j - \omega_l)\}^{-1}.$$

Як видно з (2.8) функція $\gamma_n(x_1, \dots, x_{n-1} | \mu)$ є розмірною функцією з розмірністю $N\varepsilon_F^{1-n}$. На основі виразів (2.8) отримуємо наступні вирази для невироджених кумулянтів нижчого порядку:

$$\tilde{\mu}_2^0(x, -x | \mu) = -2\text{Re} \sum_{\mathbf{k},s} \frac{n_{\mathbf{k},s}^0}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\nu} = \gamma_2(x, -x | \mu), \quad (2.9)$$

$$\tilde{\mu}_3^0(x_1, x_2, x_3 | \mu) = -\delta_{x_1+x_2+x_3,0} \{\gamma_3(x_1, -x_2 | \mu) + \gamma_3(x_1, -x_3 | \mu) + \gamma_3(x_3, -x_1 | \mu)\},$$

$$\gamma_3(x_1, x_2 | \mu) = -2\text{Re} \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s}^0 \prod_{j=1}^2 (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_j} + i\nu_j)^{-1}.$$

У випадку $n = 4$ кореляційна функція базисної системи містить крім "нормальної" компоненти $\tilde{\mu}_{4,1}^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2 | \mu)$ ще й "аномальну" $\tilde{\mu}_{4,2}^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2 | \mu)$

$$\tilde{\mu}_{4,1}^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2 | \mu) = \sum_{\sigma=\pm 1} \{\gamma_4(x_1, x_1, x_1 + \sigma x_2 | \mu) + \gamma_4(x_2, x_2, x_2 + \sigma x_1 | \mu) - \gamma_4(x_1, x_1, \sigma x_2 | \mu) - \gamma_4(x_1, x_2, \sigma x_1 | \mu)\} + \frac{2m}{\hbar^2} \sigma(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \{\gamma_3(x_1, x_1 + \sigma x_2 | \mu) + \gamma_3(x_2, x_2 + \sigma x_1 | \mu) + \gamma_3(x_1; \sigma x_2 | \mu)\}, \quad (2.10)$$

$$\tilde{\mu}_{4,2}^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2 | \mu) = - \sum_{\sigma=\pm 1} \frac{\partial}{\partial \mu} \gamma_3(x_1; \sigma x_2 | \mu),$$

$$\gamma_4(x_1, x_1, x_2 | \mu) = -2\text{Re} \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s}^0 \{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1} + i\nu_1\}^{-2} \{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2} + i\nu_1\}^{-1}.$$

В частковому випадку рівних нулеві хвильових векторів та частот, кумулянти (2.3) володіють наступними властивостями:

$$\tilde{\mu}_n^0(0, \dots | \mu) = \lim_{x_1, \dots, x_n \rightarrow 0} \tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \mu) =$$

$$= (-1)^{n+1} \frac{(n-1)!}{\beta} \sum_{\mathbf{k},s,\nu^*} [G_{\mathbf{k},s}^0(\nu^*)]^n = \quad (2.11)$$

$$= \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\partial^{n-1}}{\partial \mu^{n-1}} n_{\mathbf{k},s}^0(\mu) = \frac{\partial^{n-1}}{\partial \mu^{n-1}} \tilde{\mu}_1^0(0 | \mu) = -\frac{\partial^n}{\partial \mu^n} \Omega_0(\mu),$$

і має місце співвідношення:

$$\tilde{\mu}_{n+s}^0(x_1, \dots, x_n, 0, \dots, 0 | \mu) = \frac{\partial^s}{\partial \mu^s} \tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \mu). \quad (2.12)$$

2.2. Методи розрахунку динамічних кумулянтних кореляційних функцій базисної системи при відмінних від нуля температурах

Загалом кореляційні функції $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \mu)$ представляються у вигляді (2.8). Для подальшого дослідження та використання доцільно подати $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n | \mu)$ або через елементарні функції, або в інтегральній формі з якомога меншою кратністю інтегралів.

Перехід від суми по деякій змінній k у виразі виду $\sum_k f(k)$ до інтегралу $\int dk f(k)$ проводимо на основі формули Ейлера-Маклорена [16]:

$$\frac{2\pi}{L} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} f(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt f(t) + \Delta_k \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \Delta_k &= \frac{f(\infty) + f(-\infty)}{2} + \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{2k} \times \\ &\times \{f^{(2k-1)}(\infty) + f^{(2k-1)}(-\infty) - 2f^{(2k-1)}(0)\} + \\ &+ n \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(\Theta_n), \end{aligned} \quad (2.14)$$

де B_k – числа Бернуллі [16], $\Theta_n \in [0, 1]$, останній член у виразі для Δ_k – це залишок ряду. Доцільно розглядати випадок $m \rightarrow \infty$ (коли враховуємо весь ряд, а не його частину), тоді залишок ряду (2.13) зникає. Формула (2.13) автоматично поширюється на випадок, коли $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z$:

$$\frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} f(\mathbf{k}) + 3 \int_{S=S(k_x, k_y)} ds_{\mathbf{k}} \Delta_{k_z} + \quad (2.15)$$

$$+ 3 \int dk_x \Delta_{k_y} \Delta_{k_z} + \Delta_{k_x} \Delta_{k_y} \Delta_{k_z}. \quad (2.16)$$

Для функцій $F(\mathbf{k}|x_1, \dots, x_\rho)$, структура яких має вигляд:

$$F(\mathbf{k}|x_1, \dots, x_\rho) = \prod_{j=1}^{\rho} \frac{(n_{\mathbf{k}}^0)^{s_j}}{[\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_j} + i\nu_j]^{s_j}}, \quad (2.17)$$

$s_j, \rho \in \mathcal{N}$, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2(\mathbf{k}, \mathbf{k})}{2m}$, $n_{\mathbf{k}}^0$ – розподіл Фермі-Дірака виконуються умови:

$$\begin{aligned} 1) & F(+\infty|\dots) = F(-\infty|\dots) = 0 \\ 2) & F^{(2m-1)}(+\infty|\dots) = F^{(2m-1)}(-\infty|\dots) = 0, \\ 3) & F^{(2m-1)}(0|\dots) = 0, \end{aligned} \quad (2.18)$$

що приводить до $\Delta_{k_x} = \Delta_{k_y} = \Delta_{k_z} = 0$. Таким чином для функцій $F(\mathbf{k}|x_1, \dots, x_\rho)$, що мають вигляд (2.15), перехід від сум по \mathbf{k} до інтегралів по \mathbf{k} за формулою

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} f(\mathbf{k}) \quad (2.19)$$

є точним.

Як бачимо з (2.8), структура виразу для $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n|\mu)$ аналогічна до структури виразу (2.15), для якого виконуються умови (2.16) і є справедливий вираз (2.17) ($p = 1, s_j = 1, \rho = n$). Таким чином, можемо записати кореляційні функції $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n|\mu)$ у вигляді інтегралу за змінною \mathbf{k} .

Подальше обчислення $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n|\mu)$ передбачає розрахунок інтегралів за змінною \mathbf{k} при складній геометрії векторів $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_n$ та наявності розподілу Фермі-Дірака $n_{\mathbf{k}}^0$.

Лише для випадку $n = 2$ розташування вектора \mathbf{q} у просторі не ускладнює розрахунків кумулянта $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n|\mu)$.

2.3. Розрахунок та дослідження $\tilde{\mu}_2^0(x, -x|\mu, \beta)$ при відмінних від нуля температурах

Як відзначалося вище, один з можливих методів розрахунку динамічних кумулянтних кореляційних функцій базисної системи при абсолютному нулі температури запропоновано в роботах [1, 14]. Розрахунок кумулянта $\tilde{\mu}_2^0(x, -x|\mu)$ не є складним. Виходячи з виразів (2.9), (2.17) та переходячи до сферичної системи ($\mathbf{e}_z \parallel \mathbf{q}$) отримуємо:

$$\tilde{\mu}_2^0(x, -x|\mu) = -2\text{Re} \sum_{\mathbf{k}, s} \frac{n_{\mathbf{k}, s}^0}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\nu} = \quad (2.20)$$

$$= -\frac{V}{2\pi^3} \text{Re} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} \frac{n_{\mathbf{k}}^0}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\nu} = \frac{V}{\pi^2} \int_0^{+\infty} dk k n_k^0 \Gamma_2(k|q, \frac{\nu}{q}),$$

$$\Gamma_2(k|q, \frac{\nu}{q}) = \frac{1}{2q} \ln \left\{ \frac{(\frac{\nu}{q})^2 + (k + \frac{q}{2})^2}{(\frac{\nu}{q})^2 - (k - \frac{q}{2})^2} \right\}.$$

Введемо безрозмірні змінні: $\tilde{q} = \frac{|\mathbf{q}|}{k_F}$, $\tilde{\nu} = \frac{\nu}{2\varepsilon_F}$. Їх введення дозволяє виділити розмірну частину $\tilde{\mu}_2^0(x, -x|\mu)$:

$$\tilde{\mu}_2^0(x, -x|\mu) = \frac{3N}{2\varepsilon_F} I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|\mu), \quad (2.21)$$

$$I_{2,0} \left(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|\mu \right) = \int_0^{+\infty} dk k n_k^0 \Gamma_2 \left(k|\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q} \right).$$

Для випадку абсолютного нуля температури функція $I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|\mu)$ виражається через елементарні функції:

$$I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|1) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1 + (\frac{\tilde{\nu}}{q})^2 - \frac{\tilde{q}^2}{4}}{4\tilde{q}} \ln \left[\frac{(\frac{\tilde{\nu}}{q})^2 + (1 + \frac{\tilde{q}}{2})^2}{(\frac{\tilde{\nu}}{q})^2 + (1 - \frac{\tilde{q}}{2})^2} \right] - \frac{\tilde{\nu}}{2\tilde{q}} \left[\arctg \frac{\tilde{\nu}/\tilde{q}}{1 - \tilde{q}/2} + \arctg \frac{\tilde{\nu}/\tilde{q}}{1 + \tilde{q}/2} \right] \right\}. \quad (2.22)$$

Функція $I_{2,0}(\tilde{q}; \frac{\tilde{\nu}}{q}|1)$ для різних значень частоти $\tilde{\nu}$ приведена на мал. 1.

На жаль, для випадку $T \neq 0K$ функція $I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|\mu)$ не може бути виражена через елементарні функції, що пов'язано з наявністю в підінтегральній функції розподілу Фермі-Дірака $n_{\mathbf{k}}^0$. В цьому випадку можливими є або використання розкладів за степенями температури в області низьких температур ($T \ll \varepsilon_F/k_B$), або застосування чисельних методів.

Наближені розклади за степенями температури можливі лише в області температур, низьких у порівнянні з температурою вирождення $T/T_F \ll 1$. Для цього використовуємо формулу:

$$\int_0^{+\infty} d\varepsilon \frac{f(\varepsilon)}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}} = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon f(\varepsilon) - \frac{\pi^2}{6} \cdot \frac{T^2}{\varepsilon_F} \left\{ \frac{1}{2} f(\varepsilon) - \varepsilon_F f'(\varepsilon) \right\} \Bigg|_{\varepsilon = \varepsilon_F} - \frac{\pi^4 T^4}{8\varepsilon_F^3} \left\{ \frac{1}{10} f(\varepsilon) - \frac{\varepsilon_F}{18} f'(\varepsilon) + \frac{\varepsilon_F^2}{9} f''(\varepsilon) - \frac{7\varepsilon_F^3}{45} f'''(\varepsilon) \right\} \Bigg|_{\varepsilon = \varepsilon_F} + O(T^6), \quad (2.23)$$

де на функцію $f(\varepsilon)$ накладено умову $f(\varepsilon) \in \mathbf{C}^\infty(\mathbb{R})$. Для подальшої зручності введемо означення температурної поправки до кореляційної функції $\tilde{\mu}_2^0(x; -x|\mu)$:

$$\delta \tilde{\mu}_2^0(x|\beta) = \tilde{\mu}_2^0(x; -x|\varepsilon_F, \infty) - \tilde{\mu}_2^0(x, -x|\mu(\beta), \beta). \quad (2.24)$$

Розмірність $\delta \tilde{\mu}_2^0(x|\beta)$ така сама як і $\tilde{\mu}_2^0(x, -x|\mu)$: $(3N)(2\varepsilon_F)^{-1}$. Перейшовши до безрозмірних змінних $\tilde{q} = |\mathbf{q}|/k_F$, $\tilde{\nu} = \nu/2\varepsilon_F$, $\beta^* = (T^*)^{-1} = (k_B T/\varepsilon_F)^{-1}$, $\mu^* = \mu/\varepsilon_F$ введемо безрозмірну функцію $\delta I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|T^*)$ так, що:

$$\delta \tilde{\mu}_2^0(x|\beta) = \frac{3N}{2\varepsilon_F} \delta I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|T^*). \quad (2.25)$$

На основі виразів (2.19), (2.22) та (2.23) отримуємо:

$$\delta I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|T^*) = I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|1, 0) - I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|\mu^*(T^*), T^*). \quad (2.26)$$

Застосування виразу (2.21) для розрахунку $\delta I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|T^*)$ є дещо обмеженим: функція $\Gamma_2(k|\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q})$ належить до класу $\mathbf{C}^\infty[0, +\infty[$ в області $(q \in \mathbb{R}_+) \cup (\nu \in \mathbb{R}_+) \setminus (q = 2 \text{ при } \nu = 0)$. Для $\delta I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|T^*)$ у динамічному випадку в наближенні $(T^*)^2$ отримуємо вираз:

$$\delta I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|T^*) = \frac{\pi^2}{24} \cdot \frac{(T^*)^2}{q} \left\{ \frac{1}{2} \ln \frac{(\frac{\tilde{\nu}}{q})^2 + (1 + \frac{q}{2})^2}{(\frac{\tilde{\nu}}{q})^2 + (1 - \frac{q}{2})^2} + \frac{1 - q/2}{(\frac{\tilde{\nu}}{q})^2 + (1 - \frac{q}{2})^2} - \frac{1 + q/2}{(\frac{\tilde{\nu}}{q})^2 + (1 + \frac{q}{2})^2} \right\}, \quad (2.27)$$

який має таку асимптотику:

$$\delta I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|T^*) = \begin{cases} \frac{\pi^2}{12} (T^*)^2 \frac{q^4}{(q^2 + \nu^2)^2} \{ 1 - \frac{5}{6} \frac{q^4}{\nu^2 + q^2} + \dots \}, & q \rightarrow 0, \tilde{\nu} > q \\ \frac{\pi^2}{12} (T^*)^2 \frac{1}{(1 + (\tilde{\nu}/q)^2)^2} \{ 1 - \frac{5}{6} \frac{q^2}{1 + \nu^2/q^2} + \dots \}, & q \rightarrow 0, \tilde{\nu} < q \\ -\frac{2}{3} \frac{\pi^2 (T^*)^2}{q^3} \{ 1 - \frac{2}{q} + \frac{8(1 - (\nu/q)^2)}{q^2} + \dots \}, & q \rightarrow \infty \end{cases}$$

У статичному варіанті можемо отримати коректну асимптотику $\delta I_{2,0}(q, 0|T^*)$ в довго- та короткохвильовій областях:

$$\delta I_{2,0}(\tilde{q}, 0|T^*) = \begin{cases} \frac{\pi^2}{12} (T^*)^2 \{ 1 - \frac{5}{6} q^2 + \dots \}, & q \rightarrow 0 \\ -\frac{3}{2} \cdot \frac{\pi^2 (T^*)^2}{q^3} \{ 1 - \frac{2}{q} + \frac{8}{q^2} + \dots \}, & q \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (2.28)$$

На мал. 2, 3 зображено залежності $\delta I_{2,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q}|T^*)$ від температури та частоти, отримані на основі виразу (2.25). Чітко проявляється наявність розриву при $q = 2$ та $\nu \rightarrow 0$, що підтверджує незастосовність (2.21) для розрахунку (2.24). Функція $\Gamma_2(k|\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{q})$ містить "слабкий" логарифмічний розрив. Розрахуємо внесок, який дає в $I_{2,0}(\dots)$ δ -окіл точки $k = q/2$ в області $\nu \rightarrow 0$

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{q/2-\delta}^{q/2+\delta} dk k n_k \ln \left\{ \frac{(\frac{\nu}{q})^2 + (k + \frac{q}{2})^2}{(\frac{\nu}{q})^2 - (k - \frac{q}{2})^2} \right\} \simeq \frac{\frac{1}{4}}{1 + e^{\beta(q^2/4 - \mu)}} \times \quad (2.29)$$

$$\times \lim_{\delta \rightarrow 0} \delta \ln \left\{ \frac{(\frac{\nu}{q})^2 + q^2}{(\frac{\nu}{q})^2 + \delta^2} \right\} = 0.$$

Таким чином внесок точки $k = q/2$, де порушується умова $\Gamma_2(k|q, \frac{z}{q} \rightarrow 0) \in C^\infty[0, +\infty[$, в інтеграл (2.19) є нульовим. Отже можемо застосувати для розрахунку (2.29) чисельні методи.

На мал. 4 зображено залежність $\delta I_{2,0}(q, \frac{z}{q}|T^*)$ як функції змінної q при різних значеннях частоти ν^* та $T^*=0.2$ отриманих чисельними методами. На мал. 5 зображено залежність $\delta I_{2,0}(q, 0|T^*)$ як функції змінної q при різних значеннях температури T^* отриманих чисельними методами.

На мал. 6 приведено порівняння результатів розрахунку $\delta I_{2,0}(q, \frac{z}{q}|T^*)$, отриманих на основі виразу (2.25) чисельними методами. Бачимо тотожність результатів в області $q \rightarrow \infty$ і близькість значень функції в області $q \rightarrow 0$, що пояснюється впливом поправок вищих за $(T^*)^2$ (розбіжність становить до 5 відсотків).

Проте для подальших розрахунків інтегральних характеристик достатньо застосувати $\delta I_{2,0}(q, \frac{z}{q}|T^*)$ у формі (2.25).

На мал. 7 зображено положення екстремумів $q_{ext}^* = q_{ext}^*(\tilde{\nu})$ функції $\delta I_{2,0}(q, \frac{z}{q}|T^*)$ в залежності від величини $\tilde{\nu}$. Бачимо, що положення екстремумів суттєво залежить від значення $\tilde{\nu}^*$, T^* , а при значенні $\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_{kp} = 0.4$, один з екстремумів функції $\delta I_{2,0}(q, \frac{z}{q}|T^*)$ зникає.

2.4. Розрахунок кореляційної функції $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n|\mu)$ для $n > 2$ в області низьких температур ($T/T_F \ll 1$)

Методика розрахунку кореляційних функцій $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n|\mu)$ для випадку абсолютного нуля температури запропонована в роботах [13]. Як показано в [13], розрахунок функції $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n|\mu)$ будь-якого порядку у випадку колінарних векторів $\{\mathbf{q}_i\}_{i=1}^n$ зводиться до розрахунку $\tilde{\mu}_2^0(x, -x|\mu)$. У випадку компланарних векторів $\{\mathbf{q}_i\}_{i=1}^n$ такий розрахунок зводиться до $\tilde{\mu}_3^0(x_1, x_2, x_3|\mu)$, а в загальному випадку, коли $\{\mathbf{q}_i\}_{i=1}^n$ не задовільняють переліченим вище умовам – до розрахунку $\tilde{\mu}_4^0(x_1, x_2, x_3, -x_1 - x_2 - x_3|\mu)$.

Труднощі прямого аналітичного обчислення кумулянтів зумовлені двома причинами:

1. необхідністю інтегрування за кутовими змінними вектора \mathbf{k} із врахуванням складної геометрії векторів $\{\mathbf{q}_i\}_{i=1}^n$;
2. необхідністю розрахунків інтегралів з функцією розподілу Фермі-Дірака при відмінних від нуля температурах.

В частковому випадку $x_1=x_2=\dots=x_n=0$ кумулянти зводяться

до розрахунку похідних за хімічним потенціалом від $\tilde{\mu}_1^0(0|\mu)$:

$$\tilde{\mu}_n^0(0, \dots, 0|\mu) = \frac{\partial^{n-1}}{\partial \mu^{n-1}} \tilde{\mu}_1^0(0|\mu) = 2 \frac{\partial^{n-1}}{\partial \mu^{n-1}} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^0. \quad (2.30)$$

Застосувавши (2.21), отримуємо:

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_n^0(0, \dots, 0|\mu) &= \frac{N}{(2\varepsilon_F)^{n-1}} \left\{ R_n + \frac{\pi^2}{4} (T^*)^2 \left[\frac{C_n}{2} + \frac{n-5/2}{3} R_n \right] \right. \\ &+ \frac{\pi^4}{16} (T^*)^4 \left[\frac{7}{120} D_n + \frac{n-1/2}{6} C_n + \left(\frac{5}{2} - n\right) \left(\frac{n-3/2}{18} - 1/5\right) R_n \right] + \\ &\left. + O((T^*)^6) \right\}, \end{aligned} \quad (2.31)$$

$$R_1=1, \quad R_2=R_3=3, \quad R_n=(-1)^{n-1} 3(2n-7)!!, \quad n \geq 4,$$

$$C_1=1, \quad C_n=(-1)^{n-1} (2n-3)!!, \quad \text{при } n \geq 2,$$

$$D_n = (-1)^{n-1} (2n+1)!!, \quad \text{при } n \geq 1.$$

На мал. 8 приведено температурні поправки $\frac{(2\varepsilon_F)^{n-1}}{N} \{\tilde{\mu}_n^0(0, \dots, 0|\varepsilon_F, 0) - \tilde{\mu}_n^0(0, \dots, 0|\mu(T^*), T^*)\}$ для різних значень n . Пунктиром зображені криві в наближенні $(T^*)^2$, суцільною кривою – в наближенні $(T^*)^4$.

Розрахунок кумулянтів типу $\tilde{\mu}_{2+n}^0(x, -x, 0, \dots, 0|\mu)$ та температурних поправок до них представляє інтерес у зв'язку з їх використанням при обчисленні температурних поправок до хімічного потенціалу модельної системи. Виходячи з означень (2.12), (2.18), (2.21) отримуємо значення температурної поправки до кореляційної функції $\tilde{\mu}_3^0(x, -x, 0|\mu)$:

$$\begin{aligned} \delta \tilde{\mu}_3^0(x, 0|\beta) &= \tilde{\mu}_3^0(x, -x, 0|\infty) - \tilde{\mu}_3^0(x, -x, 0|\beta), \\ \delta \tilde{\mu}_3^0(x, 0|\beta^*) &= \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} \delta I_{3,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{q}}|T^*), \end{aligned} \quad (2.32)$$

В наближенні $(T^*)^2$ $\delta I_{3,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{q}}|T^*)$ має такий вигляд :

$$\begin{aligned} \delta I_{3,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{q}}|T^*) &= \frac{\pi^2 (T^*)^2}{12\tilde{q}} \left\{ \frac{1-q/2}{(\tilde{\nu}/\tilde{q})^2 + (1-q/2)^2} + \frac{1+q/2}{(\tilde{\nu}/\tilde{q})^2 + (1+q/2)^2} + \right. \\ &\left. + \frac{(\tilde{\nu}/\tilde{q})^2 - (1+q/2)^2}{[(\tilde{\nu}/\tilde{q})^2 + (1+q/2)^2]^2} - \frac{(\tilde{\nu}/\tilde{q})^2 - (1-q/2)^2}{[(\tilde{\nu}/\tilde{q})^2 + (1-q/2)^2]^2} \right\}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

З (2.32) отримуємо асимптотику при $\tilde{\nu} \neq 0$:

$$\delta I_{3,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{q}}|T^*) = \begin{cases} -\frac{\pi^2(T^*)^2}{12} \left\{ \frac{q^2}{q^2 + \tilde{\nu}^2} - \frac{\frac{7}{4}q^6}{[q^2 + \tilde{\nu}^2]^2} + \dots \right\}, & q \rightarrow 0, \tilde{\nu} > q \\ -\frac{\pi^2(T^*)^2}{12} \left\{ \frac{1}{(1 + (\tilde{\nu}/\tilde{q})^2)^2} + \frac{q^2/4}{[1 + (\nu/q)^2]^2} + \dots \right\}, & q \rightarrow 0, \tilde{\nu} < q \\ -\frac{\pi^2(T^*)^2}{3} \frac{1}{q^2} \left\{ 1 - \frac{4(1 + (\tilde{\nu}/\tilde{q})^2)}{q^2} + \dots \right\}, & q \rightarrow \infty. \end{cases}$$

На мал. 9 приведено графік залежності $\delta I_{3,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{q}}|T^*)$ (вираз 2.32) для різних значень частоти $\tilde{\nu}$. Як бачимо з вигляду (2.32) в точці $q = 2 \delta I_{3,0}(\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{q}}|T^*)$ має степеневу особливість в границі $\tilde{\nu} \rightarrow 0$, яка пов'язана з порушенням умови $\frac{\partial \Gamma_2(\sqrt{2\varepsilon}|q=2,0)}{\partial \varepsilon} \in C^\infty$.

Загалом, функція $\tilde{\mu}_3^0(x, -x, 0|\mu)$ в границі $\nu \rightarrow 0$ має логарифмічний розрив в точці $q/k_F = 2$ при абсолютному нулі температури, а при скінчених температурах – це екстремум, висота і форма якого визначається значенням температури. На основі (2.12), (2.18) та (2.21) можемо отримати вираз для температурної поправки до динамічної функції $\tilde{\mu}_{2+n}^0(x, -x, 0, \dots, 0|\mu)$ для довільного n в наближенні $(T^*)^2$:

$$\tilde{\mu}_{2+n}^0(x|\beta) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^{n+1}} \cdot \frac{\pi^2}{6} 2^{n-1} (T^*)^2 \left[\left\{ \frac{1}{2} \cdot \frac{d^n}{dx^n} - \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} \right\} \Gamma_2(\sqrt{x}|\tilde{q}, \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{q}}) \right]_{x=1}. \quad (2.34)$$

Для випадку $x_i \neq 0$, $i = \overline{1, n}$ для розрахунку $\tilde{\mu}_3^0(x_1, \dots, x_n|\mu)$ використаємо тотожність Фейнмана [17]:

$$\prod_{j=1}^S A_j^{-1} = (n-1)! \int_0^1 \dots \int_0^1 d\xi_1 \dots d\xi_n \delta \left(\sum_{j=1}^S \xi_j - 1 \right) \left\{ \sum_{j=1}^S \xi_j A_j \right\}^{-S}, \quad (2.35)$$

яка спрощує розрахунок інтегралів за кутовими змінними вектора \mathbf{k} . Виходячи з означення (2.8) та використовуючи (2.35) отримуємо:

$$\gamma_n(x_1, \dots, x_{n-1}|\mu_0^*) = -\text{Re} \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^{n-1}} \frac{1}{4\pi} \prod_{j=1}^{n-1} \tau_j^{-1} \sum_s \int_0^{+\infty} dk k^2 n_{\mathbf{k},s}(\mu_0^*) \times \int d\Omega_{\mathbf{k}} (n-2)! \int_0^1 \dots \int_0^1 d\alpha_1 \dots d\alpha_{n-1} \delta \left(\sum_{j=1}^{n-1} \alpha_j - 1 \right) F^{1-n}, \quad (2.36)$$

$$F = k_p^{-1}(\mathbf{k}, \rho_n) - C_n, \quad \rho_n = \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_j \mathbf{e}_j, \quad C_n = C_n^c + iC_n^s,$$

$$C_n^c = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_j \tau_j, \quad C_n^s = \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_j u_j,$$

де $k \equiv |\mathbf{k}|/k_F$, $\tau_j \equiv |\tau|k_F$, $u_j \equiv \omega_j/(2\varepsilon_F \tau_j)$, $\mathbf{e}_j \equiv \tau_j/|\tau_j|$. Оскільки при деяких наборах значень $\alpha_1, \dots, \alpha_{n-1}$ дійсна частина функції F може обертається в нуль, то необхідною умовою застосування зображення (2.35) є вимога додатньої визначеності уявної частини C_n (щоб C_n^s була знакопостійною). Ця вимога потребує попередніх елементарних перетворень в $\gamma_n(\dots)$, в результаті чого всі u_j отримують однакові знаки.

Вибираючи сферичну систему координат, вісь OZ вигідно направити вздовж вектора ρ_n . В результаті інтеграл за кутовими змінними вектора \mathbf{k} розраховується елементарно і при $n \geq 3$ одержуємо:

$$\gamma_n(x_1, \dots, x_{n-1}|\mu_0^*) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^{n-1}} \cdot \frac{1}{2} \sum_S \int_0^\infty dk k^2 n_{\mathbf{k},s}(\mu_0^*) \times \Gamma_n(k|\tau_1 \mathbf{e}_1, \dots, \tau_{n-1} \mathbf{e}_{n-1}, u_1, \dots, u_{n-1}), \quad (2.37)$$

$$\Gamma_n(k|\tau_1 \mathbf{e}_1, \dots, u_{n-1}) = (n-3)! \prod_{j=1}^{n-1} \tau_j^{-1} \int_0^1 \dots \int_0^1 d\alpha_1 \dots d\alpha_{n-1}$$

$$\delta \left(\sum_{j=1}^{n-1} \alpha_j - 1 \right) (2\rho_n)^{-1} 2\text{Re} \{ [k \rho_n - C_n]^{2-n} + (-1)^{n-1} [k \rho_n + C_n]^{2-n} \},$$

$$\rho_n = \left\{ \sum_{l,j=1}^{n-1} \alpha_j \alpha_l (\mathbf{e}_l, \mathbf{e}_j) \right\}^{1/2}.$$

Наявність δ -функції дозволяє звести розрахунок $\Gamma_n(k|\tau_1 \mathbf{e}_1, \dots, u_{n-1})$ до $(n-2)$ кратного інтегралу за скалярними змінними, і для невеликих n зобразити $\Gamma_n(\dots)$ в елементарних функціях. Приведемо тут вирази для $\Gamma_n(\dots)$ для функцій нижчого порядку ($n = 3, 4$):

$$\begin{aligned} \Gamma_2(k|q, u) &= (2q)^{-1} \ln \frac{u^2 + (k + \frac{q}{2})^2}{u^2 + (k - \frac{q}{2})^2}, \\ \Gamma_3(k|q_1, q_2, u_1, u_2, t) &= (q_1 q_2)^{-1} \text{Re} R(k|q_1, q_2, u_1, u_2, t), \\ \Gamma_4(k|q_1, q_2, u_1, u_2, t) &= q_1^{-2} q_2^{-1} \text{Re} \frac{\partial}{\partial \xi_1} R(k|q_1, q_2, u_1, u_2, t), \quad (2.38) \\ R(k|q_1, q_2, u_1, u_2, t) &= \Delta^{-1}(k) \ln \frac{\delta(k) + k\Delta(k)}{\delta(k) - k\Delta(k)}, \end{aligned}$$

$$\delta(k) = k^2 t - \xi_1 \xi_2, \quad \Delta(k) = \{k^2(t^2 - 1) + \xi_1^2 + \xi_2^2 - 2t\xi_1\xi_2\}^{1/2},$$

$$\xi_j = \frac{1}{2} q_j - i u_j; \quad j = 1, 2; \quad t = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2).$$

У випадку абсолютного нуля температури інтегрування за змінною k виконується точно. Для функцій $\gamma_3(\dots)$ та $\gamma_4(\dots)$ отримуємо наступні вирази:

$$\gamma_3(x_1, x_2 | \varepsilon_F) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} \tilde{\gamma}_3 \left(q_1, q_2, t, \frac{\tilde{\nu}_1}{q_1}, \frac{\tilde{\nu}_2}{q_2} \right),$$

$$\gamma_4(x_1, x_1, x_2 | \varepsilon_F) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^3} \tilde{\gamma}_4 \left(q_1, q_2, t, \frac{\tilde{\nu}_1}{q_1}, \frac{\tilde{\nu}_2}{q_2} \right),$$

$$\tilde{\gamma}_3(q_1, q_2, t, u_1, u_2) = -[q_1 q_2 (1 - t^2)]^{-1} \text{Re} \{ \Delta(1) M - (\xi_2 - \xi_1 t) L(\xi_1) - (\xi_1 - \xi_2 t) L(\xi_2) \}, \quad (2.39)$$

$$\tilde{\gamma}_4(q_1, q_2, t, u_1, u_2) = -[q_1 q_2 (1 - t^2)]^{-1} \text{Re} \{ \Delta^{-1}(1) M(\xi_1 - \xi_2 t) + t L(\xi_1) - L(\xi_2) \},$$

$$M \equiv \ln \left[\frac{\delta(1) + \Delta(1)}{\delta(1) - \Delta(1)} \right], \quad L(\xi) = \ln \left[\frac{1 - \xi}{1 + \xi} \right].$$

Формули (2.39) отримані на основі (2.35) і через те справедливі лише для випадку однакового знаку частот $\tilde{\nu}_1$ та $\tilde{\nu}_2$. Якщо $\tilde{\nu}_1$ та $\tilde{\nu}_2$ мають різні знаки, то з означення функцій $\gamma_3(x_1, x_2 | \mu)$ та $\gamma_4(x_1, x_1, x_2 | \mu)$ випливають такі правила зведення:

$$\gamma_3(\mathbf{q}_1, \nu_1, \mathbf{q}_2, \nu_2 | \varepsilon_F) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} \tilde{\gamma}_3(q_1, -q_2, -t, u_1, u_2),$$

$$\gamma_3(\mathbf{q}_1, \nu_1, -\mathbf{q}_2, \nu_2 | \varepsilon_F) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} \tilde{\gamma}_3(q_1, -q_2, t, u_1, u_2), \quad (2.40)$$

$$\gamma_4(\mathbf{q}_1, \nu_1, \mathbf{q}_2, \nu_2 | \varepsilon_F) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^3} \tilde{\gamma}_4(q_1, -q_2, -t, u_1, u_2),$$

$$\gamma_4(\mathbf{q}_1, \nu_1, -\mathbf{q}_2, \nu_2 | \varepsilon_F) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^3} \tilde{\gamma}_4(q_1, -q_2, t, u_1, u_2),$$

а також

$$\gamma_3(\mathbf{q}_1, \nu_1, -\mathbf{q}_2, \nu_2 | \varepsilon_F) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} \tilde{\gamma}_3(q_1, q_2, -t, u_1, u_2),$$

$$\gamma_4(\mathbf{q}_1, \nu_1, -\mathbf{q}_2, \nu_2 | \varepsilon_F) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^3} \tilde{\gamma}_4(q_1, q_2, -t, u_1, u_2),$$

$$t = \cos \frac{(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)}{|\mathbf{q}_1| |\mathbf{q}_2|}.$$

На мал. 10 приведено залежність статичного кумулянта третього порядку для випадку абсолютного нуля температури $\tilde{\mu}_3^0(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2; 0, 0, 0 | \varepsilon_F)$ при заданому значенні кута між векторами \mathbf{q}_1 та \mathbf{q}_2 . Як бачимо з малюнка, ця функція є знакопостійною функцією при всіх значеннях аргументів.

На мал. 11 наведено залежність динамічного кумулянта $\tilde{\mu}_3^0(x_1, x_2, -x_1 - x_2 | \varepsilon_F)$ для випадку абсолютного нуля температури при фіксованому значенні кута між векторами \mathbf{q}_1 та \mathbf{q}_2 та невеликих значеннях безрозмірних частот $\tilde{\nu}_1$ та $\tilde{\nu}_2$.

Мал. 12 зображає засереджену за кутовими змінними "нормальну" складову функції четвертого порядку

$$f_4(q_1, q_2, \nu_1, \nu_2) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \tilde{\mu}_{4,1}^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2 | \varepsilon_F) dt \quad (2.41)$$

при абсолютному нулі температури для фіксованих частот $\tilde{\nu}_1, \tilde{\nu}_2$. Виходячи з означення (2.9) для кореляційної функції $\tilde{\mu}_3^0(\dots)$ та виразу для $\gamma_3(\dots)$ (2.37) отримуємо температурну поправку $\delta \tilde{\mu}_3^0(\dots | \beta)$ до кореляційної функції третього порядку: $\delta \tilde{\mu}_3^0(\dots | \beta) = \tilde{\mu}_3^0(\dots | \infty) - \tilde{\mu}_3^0(\dots | \beta)$, $\delta \tilde{\mu}_3^0(\dots | \beta) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} \delta I_{3,0}(\dots)$:

$$\delta I_{3,0}(q_1, q_2, u_1, u_2, t_{12} | T^*) = I_{3,0}(q_1, q_2, u_1, u_2, t_{12} | 0) - I_{3,0}(q_1, q_2, u_1, u_2, t_{12} | T^*),$$

$$I_{3,0}(q_1, q_2, u_1, u_2, t_{12} | T^*) = \Phi(q_2; -q_3; u_2; u_3; t_{23} | T^*) + \Phi(-q_3; q_1; u_3; u_1; t_{13} | T^*) - \Phi(q_1; q_2; u_1; u_2; t_{12} | T^*), \quad (2.42)$$

$$\Phi(q_1; q_2; u_1; u_2; t_{12} | T^*) = \frac{1}{|\mathbf{q}_1| |\mathbf{q}_2|} \int_0^{+\infty} dk k^2 n_k^0 \Gamma_3(q_1; q_2; u_1; u_2; t_{12}),$$

$$\Gamma_3(q_1; q_2; u_1; u_2; t_{12}) = \frac{A_1 \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} + |p_1|} + A_2 \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} - |p_1|}}{2\sqrt{p_1^2 + p_2^2}} \times$$

$$\times \left[\ln \left\{ \frac{(A_1 + B_1 - \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} + |p_1|})^2 + (A_2 + B_2 - \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} - |p_1|})^2}{(A_1 + B_1 + \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} + |p_1|})^2 + (A_2 + B_2 + \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} - |p_1|})^2} \right\} \right. \\ \left. - \ln \left\{ \frac{(B_1 - \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} + |p_1|})^2 + (B_2 - \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} - |p_1|})^2}{(B_1 + \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} + |p_1|})^2 + (B_2 + \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} - |p_1|})^2} \right\} \right]$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{A_2 \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} - |p_1|} - A_1 \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} + |p_1|}}{\sqrt{p_1^2 + p_2^2}} \times \\
& \left[\operatorname{arctg} \frac{A_2 + B_2 - \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} - |p_1|}}{A_1 + B_1 - \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} + |p_1|}} + \operatorname{arctg} \frac{B_2 + \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} - |p_1|}}{B_1 + \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} + |p_1|}} - \right. \\
& \left. - \operatorname{arctg} \frac{A_2 + B_2 + \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} - |p_1|}}{A_1 + B_1 + \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} + |p_1|}} - \operatorname{arctg} \frac{B_2 - \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} - |p_1|}}{B_1 - \sqrt{\sqrt{p_1^2 + p_2^2} + |p_1|}} \right], \\
A_1 &= \frac{(q_1 + q_2)^2}{4} - (u_2 - u_1)^2 - 2k^2(1 - t_{12}), \\
A_2 &= (q_1 + q_2) \cdot (u_2 - u_1), \\
B_1 &= -\frac{q_2(q_1 + q_2)}{4} + u_2(u_2 - u_1) + k^2(1 - t_{12}), \\
B_2 &= \frac{1}{2} \{ (u_1 - u_2)q_2 - u_2(q_1 + q_2) \}, \\
C_1 &= \frac{q_2^2}{4} - u_2^2 - k^2, \quad C_2 = q_2 u_2, \\
P_1 &= B_1^2 - B_2^2 - A_1 C_1 + A_2 C_2, \\
P_2 &= 2B_1 B_2 - A_1 C_2 - A_2 C_1, \\
t_{13} &= \frac{q_1 + t_{12} q_2}{q_3}, \quad t_{23} = \frac{q_2 + t_{12} q_1}{q_3}, \\
q_3 &= \sqrt{q_1^2 + q_2^2 + 2q_1 q_2 t_{12}}, \quad u_3 = (u_1 q_1 + u_2 q_2) / q_3.
\end{aligned}$$

Функція $I_{3,0}(q_1; q_2; u_1; u_2; t_{12} | \infty)$, береться у формі (2.39), (2.40). Можливо явним чином записати вираз для $\delta I_{3,0}(\dots)$, скориставшись формулою (2.21), проте результат буде надто громіздким, щоб його можна було проаналізувати. Більш доцільним в цьому випадку є застосування чисельного методу.

На мал. 13 наведено $\delta I_{3,0}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, u_1, u_2; t_{12} | T)$ як функції змінних $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ та параметрів $u_1 = u_2 = 0.2$. Вигляд для поправки $\delta I_{3,0}(\dots)$ в розрізі q_1, u_1 та параметри q_2, u_2, t_{12}, T^* нагадує $\delta I_{2,0}(q_1, u_1 | T)$.

Подібним чином можемо отримати температурні поправки до кореляційних функцій вищих порядків ($n \geq 4$).

3. Прямий розрахунок характеристик слабо неідеальних систем при низьких температурах

3.1. Хімічний потенціал моделі електронної рідини в області низьких температур

В якості базисної системи зручно використати систему невзаємодіючих ферміонів при абсолютному нулі температури. Шуканий хімічний потенціал μ представимо у вигляді суми:

$$\mu = \mu_0^0 + \Delta\mu + \delta\mu, \quad (3.1)$$

де μ_0^0 – хімічний потенціал базисної системи, $\Delta\mu$ – поправка, зумовлена взаємодією при $T = 0K$ (розрахована в роботі [3]), $\delta\mu$ – температурна поправка до хімпотенціалу. В області низьких температур ($T \ll T_F$, $T_F = \varepsilon_F/k_B$, $T^* = T/T_F$) невідома складова $\delta\mu$ повинна задовільняти умовам:

$$\lim_{\substack{T^* \rightarrow 0 \\ r_s \neq 0}} \delta\mu(T^*, r_s) = 0, \quad \lim_{\substack{r_s \rightarrow 0 \\ T^* \neq 0}} \delta\mu(T^*, r_s) = -\frac{\pi^2}{12} (T^*)^2. \quad (3.2)$$

В області низьких температур обмежимося лінійними степенями відхилення $\Delta\mu + \delta\mu$ у виразі (1.2.5):

$$\beta N = \langle d_1(\omega | \beta, \mu_0^0) \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H \xi} + (\Delta\mu + \delta\mu) \langle d_2(\omega | \beta, \mu_0^0) \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H \xi} + O((\delta\mu + \Delta\mu)^2). \quad (3.3)$$

Вводячи температурне відхилення до будь-якої функції $A(\dots | \beta, \mu_0^0)$:

$$\Delta A(\dots | \beta, \mu_0^0 - \mu_0^0) = A(\dots | \beta, \mu_0^0) - A(\dots | \infty, \mu_0^0), \quad (3.4)$$

та виділяючи температурну залежність в середніх типу $\langle \dots \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H \xi}$, отримуємо для $\delta\mu$ вираз:

$$\begin{aligned}
\delta\mu &= - \frac{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\Delta\mu)^{n-1}}{(n-1)!} \langle \Delta d_n(\omega | \beta, \mu_0^0 - \mu_0^0) \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H \xi} - \sum_{n,m=1}^{\infty} \frac{(\Delta\mu)^{n+m-1}}{m!(n-1)!}}{\sum_{n=2}^{\infty} \frac{(\Delta\mu)^{n-2}}{(n-2)!} \langle d_n(\omega | \infty, \mu_0^0) \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H}} \times \\
&\times \{ \langle d_n(\omega | \infty, \mu_0^0) \Delta d_m(\omega | \beta, \mu_0^0 - \mu_0^0) \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H} - \langle d_n(\omega | \infty, \mu_0^0) \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H} \times \\
&\times \langle \Delta d_m(\omega | \beta, \mu_0^0 - \mu_0^0) \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H} \}. \quad (3.5)
\end{aligned}$$

Розрахунок середніх $\langle d_n(\omega | \infty, \mu_0^0) \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H}$ та $\Delta d_m(\omega | \beta, \mu_0^0 - \mu_0^0) \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H}$ приводить до виразів, що побудовані на екранованих потенціалах

$b_n(x_1, \dots, x_n)$ (див. [1-3]):

$$\begin{aligned} \langle d_n(\omega|\infty, \mu_0^0) \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H} &= \beta \left\{ \tilde{\mu}_0^0(0, \dots, 0|\infty, \mu_0^0) + \frac{\partial^n}{\partial(\mu_0^0)^n} \sum_{p=2}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p!} \times \right. \\ &\times \left. \sum_{x_1, \dots, x_p} b_p(x_1, \dots, x_p) \tilde{\mu}_p^0(x_1, \dots, x_p|\infty, \mu_0^0) \right\}, \quad (3.6) \\ \Delta d_m(\omega|\beta, \mu_0^0 - \mu_0^0) \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H} &= \beta \left\{ \tilde{\mu}_0^0(0, \dots, 0|\beta, \mu_0^0 - \mu_0^0) + \frac{\partial^m}{\partial(\mu_0^0)^m} \right. \\ &\left. \sum_{p=2}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p!} \sum_{x_1, \dots, x_p} b_p(x_1, \dots, x_p) \tilde{\mu}_p^0(x_1, \dots, x_p|\beta, \mu_0^0 - \mu_0^0) \right\}. \end{aligned}$$

В області слабкої неідеальності обмежимося першими членами рядів виразу (3.5). Врахувавши (3.6), вираз для $\delta\mu$ перепишемо у вигляді:

$$\begin{aligned} \delta\mu = & \frac{\Delta \tilde{\mu}_1^0(0|\beta, \mu_0^0 - \mu_0^0) + \Delta\mu \Delta \tilde{\mu}_2^0(0, 0|\beta, \mu_0^0 - \mu_0^0)}{M_2(0, 0)} + \\ & \frac{\frac{1}{2} \sum_x b_2(x, -x) \{ \Delta \tilde{\mu}_3^0(x, -x, 0|\beta, \mu_0^0 - \mu_0^0) + \Delta \tilde{\mu}_4^0(x, -x, 0, 0|\beta, \mu_0^0 - \mu_0^0) \}}{M_2(0, 0)}, \quad (3.7) \end{aligned}$$

де $M_2(0, 0)$ – поляризаційний оператор:

$$M_2(0, 0) = \langle d_2(\omega|\infty, \mu_0^0) \rangle_{f_0 \mathcal{J}_H} = \frac{3N}{2\varepsilon_F} \cdot \frac{\tau}{\tau_0}. \quad (3.8)$$

τ/τ_0 – відносна стисливість для $T = 0K$, розрахована в [3]. Застосовуючи розклади за степенями температури для поправок $\Delta \tilde{\mu}_1^0(0|\beta, \mu_0^0 - \mu_0^0)$, $\Delta \tilde{\mu}_2^0(0, 0|\beta, \mu_0^0 - \mu_0^0)$, $\Delta \tilde{\mu}_3^0(x, -x, 0|\beta, \mu_0^0 - \mu_0^0)$, $\Delta \tilde{\mu}_4^0(x, -x, 0, 0|\beta, \mu_0^0 - \mu_0^0)$ запишемо $\delta\mu$ через безрозмірні змінні T^* та r_s :

$$\begin{aligned} \frac{\delta\mu}{\varepsilon_f} = & -\frac{\tau_0}{\tau} \cdot \frac{\pi^2 (T^*)^2}{12} \left\{ 1 - \frac{\Delta \tilde{\mu}}{2} - \frac{r_s}{\pi^2 \eta} - \frac{4r_s^2}{\pi^3 \eta} \int_0^{\infty} dq du \times \right. \\ & \times \left. \frac{I_{2,0}(q, u|0, 1) \Phi_1(q, u)}{q^2 + \frac{4r_s}{\pi \eta} I_{2,0}(q, u|0, 1)} \right\}, \quad (3.9) \\ \Phi_1(q, u) = & \frac{1-q/2}{u^2 + (1-q/2)^2} - \frac{1+q/2}{u^2 + (1+q/2)^2} + \frac{u^2 - (1+q/2)^2}{[u^2 + (1+q/2)^2]^2} - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - \frac{u^2 - (1-q/2)^2}{[u^2 + (1-q/2)^2]^2} \\ \Delta \tilde{\mu} = & \Delta\mu/\varepsilon_F. \end{aligned}$$

Використавши результати роботи [3] з розрахунку τ_0/τ та $\Delta\mu$, отримуємо наступну границю для $\delta\mu^* = \frac{\delta\mu}{\varepsilon_F}$:

$$\delta\mu^* = \begin{cases} -\frac{\pi^2}{12} (T^*)^2, & T^* \neq 0, r_s \rightarrow 0 \\ 0, & T^* \rightarrow 0, r_s \neq 0, \end{cases}$$

яка повністю задовільняє умовам (3.2).

На мал. 14 приведено результати розрахунку $\frac{\delta\mu^*}{(T^*)^2}$ в різних наближеннях. Пунктирна крива відповідає наближенню $\tau_0/\tau = 1$. Криві 1 – наближення RPA , криві 2 – врахування поправки на локальне поле $G(x)$, коли $G(x) \simeq G_1(x)$. Криві 3 – врахування повної поправки на локальне поле $G(x)$. Як видно з малюнка, поведінка кривих в границі $r_s \rightarrow 0$ не відрізняється, проте з ростом r_s поведінка кривих різна: в наближенні $\tau_0/\tau \simeq 1$ це монотонно зростаючі функції, в іншому випадку – це криві, що мають екстремум (максимум). В наближенні τ_0/τ функція $\simeq 1 - \frac{\delta\mu^*}{(T^*)^2}$ в околі точки $r_s \simeq 5.7$ міняє знак.

3.2. Вільна енергія та теплоємність

Для розрахунку температурної залежності вільної енергії в якості базисної системи вигідно вибрати систему невзаємодіючих ферміонів при відмінних від нуля температурах. У цьому випадку в n -частинкових кумулянтних кореляційних функціях базисної системи $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n|\beta, \mu)$ крім явної залежності від температури повинна бути врахована неявна залежність через хімічний потенціал, який також є функцією температури.

Для вільної енергії є справедливий наступний розклад за хімічним потенціалом μ в околі деякої точки μ_0 [2]:

$$F[\beta, \mu, V] = F[\beta, \mu_0, V] - \sum_{n=2}^{\infty} (\mu - \mu_0)^n \frac{n-1}{n!} \cdot \frac{\partial^n}{\partial(\mu_0)^n} \Omega(\mu_0). \quad (3.10)$$

Введемо наступні позначення:

$$\mu_0^* = \mu_0^{id}(T^*) + \Delta\mu^{int}(r_s),$$

$$\begin{aligned}\mu_0^{id}(T^*) &= \mu_0^0 + \delta\mu_0^{id}(T^*), \\ \mu &= \mu_0^* + \delta\mu^{int}(r_s, T^*) = \mu_0^0 + \delta\mu_0^{id}(T^*) + \Delta\mu^{int}(r_s) + \delta\mu^{int}(T^*, r_s),\end{aligned}\quad (3.11)$$

де μ_0^0 – хімічний потенціал системи невзаємодіючих ферміонів при $T = 0K$, $\delta\mu_0^{id}(T^*)$ – температурна поправка до μ_0^0 для системи невзаємодіючих ферміонів, $\Delta\mu^{int}(r_s)$ – поправка, спричинена взаємодією при $T = 0K$, $\delta\mu^{int}(r_s, T^*)$ – поправка, спричинена взаємодією при відмінних від нуля температурах.

Нехай за точку розкладу вільної енергії (3.9) виберемо μ_0^* , тоді $\mu - \mu_0^* = \delta\mu^{int}(r_s, T^*)$. Як показано в підрозділі (3.1), величина $\delta\mu^{int}(r_s, T^*)$ співпадає з $\delta\mu$ (3.7) за умови виділення внеску від поправки до ідеальної системи $\delta_0^{id}(T^*)$, тобто $\delta\mu^{int}(r_s, T^*) \sim (T^*)^2$. Обмежуємося розглядом членів $\sim (T^*)^2$. Це значить, що другий член виразу (3.9), а саме $\sum_{n \geq 2} [\delta\mu^{int}(r_s, T^*)]^n \frac{n-1}{n!} \cdot \frac{\partial}{\partial(\mu_0^*)} \Omega(\mu_0^*)$ містить члени, пропорційні четвертій і вищим степеням температури. Таким чином цей член можемо опустити з розгляду, а для вільної енергії отримуємо вираз:

$$F[\beta, \mu, V] \cong F[\beta, \mu_0^*, V] = \mu_0^* N - \frac{1}{\beta} \ln Z[\beta, \mu_0^*], \quad (3.12)$$

де $Z[\beta, \mu_0^*]$ має вигляд (1.2.2). Враховуючи, що

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_0(\omega|\beta, \mu_0^{id}(T)) &= \mathcal{J}_0^{(n)}(\omega|\infty, \mu_0^0) \exp \left\{ \sum_{n=2}^{\infty} \Delta D_n(\omega|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) + \right. \\ & \left. D_n^{(a)}(\omega|\infty, \mu_0^0) \right\}, \\ d_n(\omega|\beta, \mu_0^{id}(T)) &= d_n(\omega|\infty, \mu_0^0) + \Delta d_n(\omega|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0), \\ D_n(\omega|\beta, \mu_0^{id}(T)) &= D_n(\omega|\infty, \mu_0^0) + \Delta D_n(\omega|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0),\end{aligned}\quad (3.13)$$

підставимо (3.12) в (1.2.2):

$$\begin{aligned}Z[\beta, \mu_0^*] &= Z_0[\beta, \mu_0^{id}(T)] \times \\ & \times \left\langle \mathcal{J}_0^{(n)}(\omega|\infty, \mu_0^0) e^{\sum_{n \geq 2} \Delta D_n(\omega|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) + D_n^{(a)}(\omega|\infty, \mu_0^0)} \right. \\ & \times \exp \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{[\Delta\mu^{int}(r_s)]^m}{m!} \{d_m(\omega|\infty, \mu_0^0) + \Delta d_m(\omega|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0)\} \right\} \Bigg\rangle_{f(\omega)} = \\ & = Z_0[\beta, \mu_0^0] \exp \{ -\beta \Delta \Omega_0(\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) \} \langle \mathcal{J}_0^{(n)}(\omega|\infty, \mu_0^0) \rangle_{f(\omega)} \times\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}& \times \left\langle \exp \left\{ \sum_{n=2}^{\infty} \{D_n(\omega|\infty, \mu_0^0) + \Delta D_n(\omega|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0)\} \right\} \times \right. \\ & \left. \exp \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{[\Delta\mu^{int}(r_s)]^m}{m!} \{d_m(\omega|\infty, \mu_0^0) + \Delta d_m(\omega|\dots)\} \right\} \right\rangle_{f \mathcal{J}_0^{(n)}}.\end{aligned}\quad (3.14)$$

В роботі [18] показано, що для випадку центрально-симетричного V_q при абсолютному нулі температури має місце повна компенсація внесків аномальних кореляцій і зсуву хімічного потенціалу $\Delta\mu^{int}(r_s)$. В області низьких температур розкладемо $\exp \left\{ \sum_{n \geq 2} \Delta D_n(\dots) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[\Delta\mu^{int}(r_s)]^n}{n!} \Delta d_n(\dots) \right\}$ в ряд за степенями $\Delta D_n(\dots)$ та $\Delta d_m(\dots)$ і обмежуємося врахуванням членів, пропорційних $(T^*)^2$. Подальший розрахунок середнього (3.13) проводимо згідно з методикою запропонованою в роботі [1].

В результаті засереднення (3.13) отримуємо:

$$\begin{aligned}Z[\beta, \mu_0^*] &= Z_0[\beta, \mu_0^0] e^{-\beta \Delta \Omega_0(\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0)} \times \\ & \times \left\{ 1 + \beta [\Delta\mu \Delta \tilde{\mu}_1^0(0|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) + \frac{1}{2} \sum_x b_2(x, -x) \times \right. \\ & \times \Delta \tilde{\mu}_2^0(x, -x|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0)] + \beta \left[\frac{\Delta\mu}{2} \sum_x b_2(x, -x) \times \right. \\ & \times (\beta \Delta \tilde{\mu}_2^0(x, -x|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) + \Delta \tilde{\mu}_3^0(x, -x, 0|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{x,y} b_4(x, -x, y, -y) x \Delta \tilde{\mu}_4^0(x, -x, y, -y|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) + (\Delta\mu)^2 \times \\ & \left. \left. \{ \beta \tilde{\mu}_1^0(0|\mu_0^0) + \Delta \tilde{\mu}_1^0(0|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) \frac{1}{2} \Delta \tilde{\mu}_2^0(0, 0|\beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) \} \right] + \right. \\ & \left. + O(r_s^3) \right\}.\end{aligned}\quad (3.15)$$

Після підстановки (3.14) в (3.11) вираз для вільної енергії $F[\beta, \mu_0^*, V]$ можемо записати у вигляді суми:

$$F[\beta, \mu_0^*, V] = F(\infty, \mu_0^0 + \Delta\mu^{int}(r_s), V) + \Delta F(\beta), \quad (3.16)$$

де $F(\infty, \mu_0^0 + \Delta\mu^{int}(r_s), V)$ – вільна енергія моделі електронної рідини при абсолютному нулі температури [3], а $F(\beta)$ – температурна поправка, спричинена взаємодією при відмінних від нуля температурах. Для $\Delta F(\beta)$ повинна виконуватися умова:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \Delta F(T) = 0. \quad (3.17)$$

Як видно з (3.14) та (3.15), $\Delta F(\beta)$ має вигляд:

$$\begin{aligned} \Delta F(T) &= N \delta \mu_0^{id}(T) + \Delta \Omega(\beta | \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) - \\ &[\Delta \mu \Delta \tilde{\mu}_1^0(0 | \beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) + \frac{1}{2} \sum_x b_2(x, -x) \Delta \tilde{\mu}_2^0(x, -x | \beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0)] \\ &- \left[\frac{(\Delta \mu)^2}{2} \{ \Delta \tilde{\mu}_2^0(0, 0 | \beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) + 2\beta \tilde{\mu}_1^0(0 | \mu_0^0) \right. \\ &\Delta \tilde{\mu}_1^0(0 | \beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) \} + \frac{1}{4!} \sum_{x,y} b_4(x, -x, y, -y) \times \\ &\times \Delta \tilde{\mu}_4^0(x, -x, y, -y | \beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) + \frac{\Delta \mu}{2} \sum_x b_2(x, -x) \times \\ &\times \{ \beta \Delta \tilde{\mu}_2^0(x, -x | \beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) + \Delta \mu_3^0(x, -x, 0 | \beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) \}] + \\ &+ O(r_s^3), \end{aligned} \quad (3.18)$$

або в безрозмірних змінних $q = q/k_F$, $u = \frac{\nu}{2q\varepsilon_F}$:

$$\begin{aligned} \delta F(\beta) &= N \varepsilon_F (T^*)^2 \{ \Delta F_0 + \Delta F_1 + \dots \}, \\ \Delta F_0 &= \{ N \varepsilon_F (T^*)^2 \}^{-1} \{ N \delta \mu_0^{id}(T) + \Delta \Omega_0(\beta | \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) \} = -\frac{\pi^2}{4}, \\ \Delta F_1 &= \{ N \varepsilon_F (T^*)^2 \}^{-1} \{ -\Delta \mu \Delta \mu_1^0(0 | \beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) - \\ &-\frac{1}{2} \sum_x b_2(x, -x) \Delta \tilde{\mu}_2^0(x, -x | \beta, \mu_0^{id}(T) - \mu_0^0) \} = \\ &= \frac{\pi^2}{4} \left\{ \frac{r_s}{\pi \eta} \int_0^2 \frac{dq q (1-q^2/2)}{q^2 + \frac{4r_s}{\pi \eta} I_{2,0}(q, 0 | 1, 0) [1-G(q, 0)]} + \frac{4r_s^2}{\pi^3 \eta} \int_0^\infty dq du \times \right. \\ &\times \Phi_2(q, u) \left\{ \frac{I_{2,0}(q, u | 1, 0) G(q, u)}{q^2 + \frac{4r_s}{\pi \eta} I_{2,0}(q, u | 1, 0) [1-G(q, u)]} - \right. \\ &\left. \left. -q^2 \left[\frac{I_{2,0}(q, 0 | 1, 0) [1-G(q, 0)] - I_{2,0}(q, u | 1, 0) [1-G(q, u)]}{[q^2 + \frac{4r_s}{\pi \eta} I_{2,0}(q, 0 | 1, 0) [1-G(q, 0)]]^2} \right]^2 \right\} \right\}, \\ \Phi_2(q, u) &= \frac{1}{2} \ln \frac{u^2 + (1+q/2)}{u^2 + (1-q/2)} + \frac{1-q/2}{u^2 + (1/q)^2} - \frac{1+q/2}{u^2 + (1+q/2)^2}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

На мал. 15 зображено графік залежності вільної енергії $F(\beta)$ $(N \varepsilon_F)^{-1}$ як функцію параметра r_s при різних значеннях температури.

На мал. 16 зображено залежність вільної енергії на одну частинку як функцію параметра r_s при $T^* = 0, 1$, розраховану в різних

наближеннях. Врахування поправки на локальне поле приводить до зменшення значення вільної енергії в точці мінімуму і до зсуву положення точки мінімуму в напрямку зменшення параметра r_s .

Виходячи з виразу для вільної енергії (3.18) можемо розрахувати відносну теплоємність (C_v/C_v^0) для модельної системи:

$$\frac{C_v}{C_v^0} = 1 + \frac{\Delta F_1}{\Delta F_0} + 0(r_s^3). \quad (3.20)$$

На мал. 17 зображено відношення $\frac{C_v}{C_v^0}$ розраховане в різних наближеннях. GM – наближення Гелл-Манна, коли у виразі (1.4.18) для ΔF_1 враховано лише перший інтеграл, в якому зроблено заміну $I_{2,0}(q, 0 | 1, 0) [1-G(q, 0)] \rightarrow 1$ (наведено пунктирною лінією). Дане наближення описує асимптотику відношення $\frac{C_v}{C_v^0}$ в області $r_s \rightarrow 0$. Інші криві: RPA – результат розрахунку в наближенні хаотичних фаз $LFA(G_{id}$ – наближення локального поля, коли використано функцію поправки на локальне поле в наближенні G_{id} , LPA – результат розрахунку з функцією локального поля (див. [3]).

3.3. Висновки

Запропонована методика розрахунку кореляційних функцій системи ідеальних ферміонів з однаковим успіхом може бути застосована при дослідженні кореляційних функцій різних порядків $n = 2, 3, \dots$. На основі отриманих виразів для температурних поправок до кореляційних функцій проведено розрахунок деяких термодинамічних характеристик моделі електронної рідини в області слабкої неідеальності. Приведені в цій роботі розрахунки термодинамічних характеристик в області слабкої неідеальності підтверджують думку про те, що розрахунок цих характеристик в області проміжної та сильної неідеальності необхідно проводити, виходячи з параметричної форми для вільної енергії через інтеграл заряджання, хоча такий розрахунок можливий лише при умові попереднього розрахунку та дослідження температурної залежності поправки на локальне поле.

Література

1. M.Vavrukh and T.Krokhmalkii. Reference System Approach in the Electron Liquid Theory. I. General Relation // phys. stat. sol. (b). - 1991. - **168**. - P. 519-532.

2. M.Vavrukh and T.Krokhmalkii. Reference System Approach in the Electron Liquid Theory. II. Ground State Characteristics in the Medium Density Region // *phys. stat. sol. (b)*. - 1992. - **169**. - P. 451-462.
3. M.Vavrukh, V.Solovyan and N.Vavrukh. Reference System Approach in the Electron Liquid Theory. III. Dynamic Function of Local-Field Correction // *phys. stat. sol. (b)*. - 1993. - **177**. - P. 361-371.
4. M.Vavrukh, N.Vavrukh. Reference System Approach in the Electron Liquid Theory. IV. Momentum Distribution // *phys. stat. sol. (b)*. - 1994. - **186**. - P. 159-169.
5. M.Vavrukh, V.Paslavskii. Reference System Approach in the Electron Liquid Theory. VI. Generalized Fermi System Model. Local-Field Correction Function // *phys. stat. sol. (b)*. - 1998. - **208**. - P. 91-104.
6. A.A.Abrikoso, L.P.Gor'kov and I.Ye.Dzyaloschinskii. *Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics*. Pergamon, London, 1965.
7. Kohn W., Luttinger J.M. Ground-state energy of a many-fermion system // *Phys. Rev.* - 1960. - **118**. - N 1. - P. 41-45.
8. Luttinger J.M., Ward J.C. Ground-state energy of a many-fermion system. II // *Phys. Rev.* - 1960. - **118**. - N 5. - P. 1417-1427.
9. Montroll E.W., Ward J.C. Quantum statistic of the system for interacting particles // *Phys. Fluids*. - 1958. - **1**. - P. 55.
10. Gell-Mann M., Brueckner K.A. Correlation energy of an electron gas at high density // *Phys. Rev.* - 1957. - **106**. - P. 364-368.
11. Lloyd P. and Sholl C.A. A structural expansion of the cohesive energy of simple metals in the effective Hamiltonian approximation // *J. Phys. C*. - 1968. - **1**. - N 3. - P. 1620-1632.
12. Бровман Е.Г., Каган Ю. Об особенностях многохвостных кольцевых диаграмм для ферми-систем // *ЖЭТФ*. - 1972. - **63**. - вып. 5. - С. 1937-1949.
13. Бровман Е.Г., Холас А.Общий метод интегрирования многохвостных кольцевых диаграмм для ферми-систем // *ЖЭТФ*. - 1974. - **66**. - вып. 5. - С. 1877-1894.
14. Ваврух М.В. Расчет динамических многохвосток в теории электронного газа. - Киев, - 1979. - 22 с. - (Препринт /АН УССР ИТФ; ИТФ-79-143Р)
15. Ваврух М.В., Буній Р.В. Про спектральне зображення температурних функцій Гріна // *Доп. НАН України*, 1995. - сер. А. - N 5. - С. 50-53.

16. Корн Г. и Корн Т. Справочник по математике // М. Наука, 1977. - 831 с.
17. Хуан Р., Теплиц В. Гомология и фейнмановские интеграллы // М. Мир, 1969. - 233 с.
18. Ваврух М.В. Крохмальский Т.Е. Химический потенциал взаимодействующего вырожденного электронного газа и связанные с этим вопросы. - Киев, - 1985. - 37 с. - (Препринт /АН УССР ИТФ; ИТФ-85-119Р)

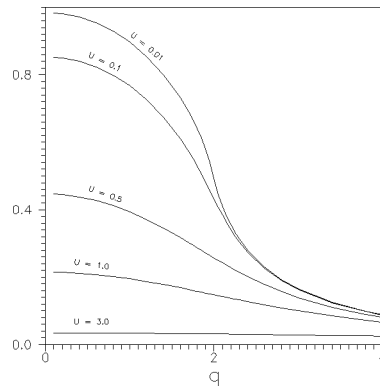


Рис. 1. Парна кореляційна функція $\tilde{\mu}_2^0(q; u)$ розрахована при абсолютному нулі температури.

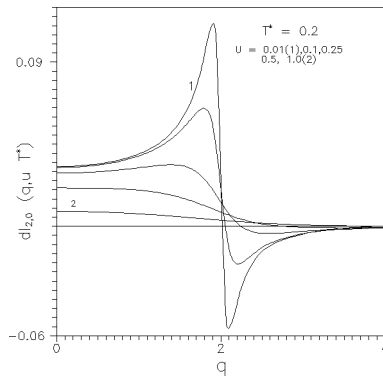


Рис. 2. Температурна поправка до кореляційної функції $\tilde{\mu}_2^0(q; u)$ розрахована на основі формули (2.28) при $T^* = 0.2$ для різних частот u .

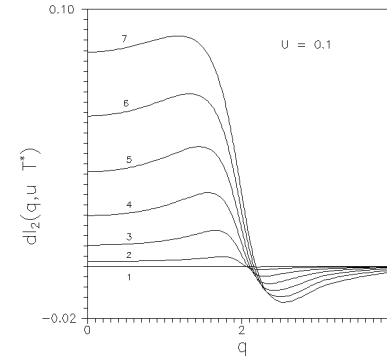


Рис. 3. Температурна поправка до кореляційної функції $\tilde{\mu}_2^0(q; u)$ розрахована на основі формули (2.28) при $u = 0.5$ для різних значень температури T^* (1 – 0.01, 2 – 0.05, 3 – 0.1, 4 – 0.15, 5 – 0.2, 6 – 0.25, 7 – 0.3).

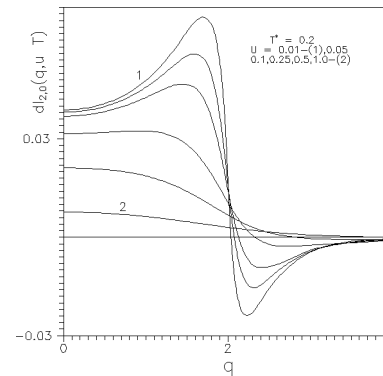


Рис. 4. Температурна поправка до кореляційної функції $\tilde{\mu}_2^0(q; u)$ розрахована на основі формули (2.21) при $T^* = 0.2$ для різних частот u .

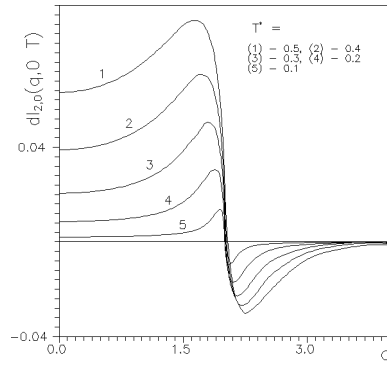


Рис. 5. Температурна поправка до кореляційної функції $\tilde{\mu}_2^0(q; u)$ розрахована на основі формули (2.21) при $u = 0.5$ для різних значень температури T^* .

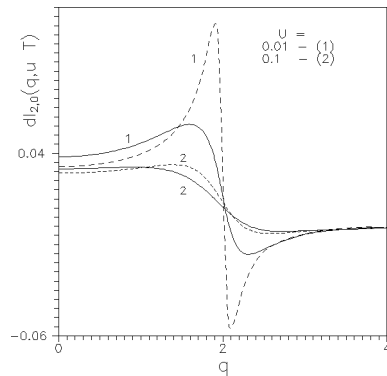


Рис. 6. Температурні поправки до кореляційної функції $\tilde{\mu}_2^0(q; u)$ розраховані на основі формул (2.21) (суцільна крива) та (2.28).

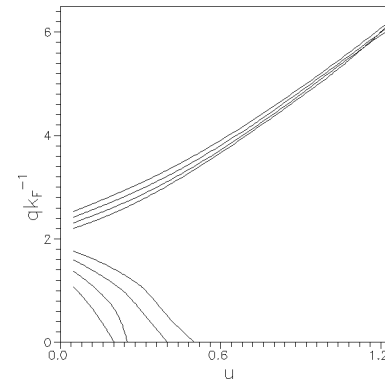


Рис. 7. Положення екстремумів функції $\delta\tilde{\mu}_2^0(q; u | T^*)$ та залежність їх положення від температури.

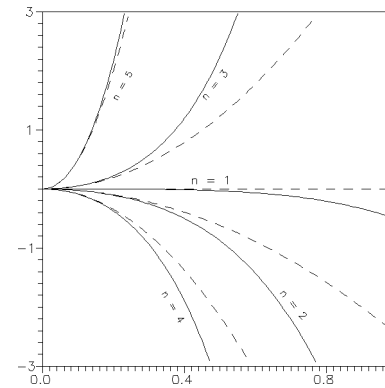


Рис. 8. Залежність температурної поправки $\delta\tilde{\mu}_n^0(0, \dots | T^*)$ від n .

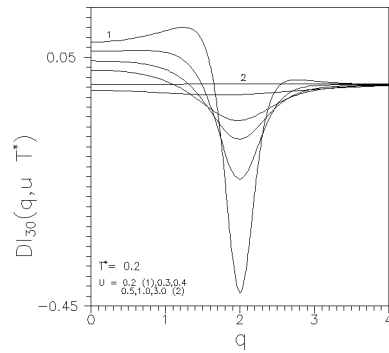


Рис. 9. Температурна поправка $\delta\tilde{\mu}_3^0(q, u|T^*)$ для різних значень частоти u .

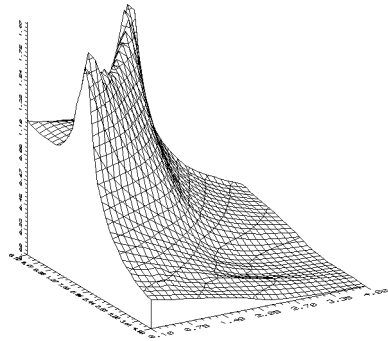


Рис. 10. Статична $\delta\tilde{\mu}_3^0(q_1, q_2, 0, 0, \cos(\bar{\mathbf{q}}_1 \mathbf{q}_2)=1|T^*)$ розрахована при абсолютному нулі температури.

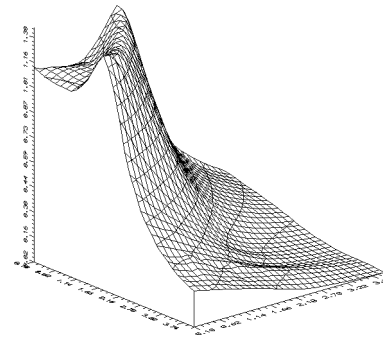


Рис. 11. Статична $\delta\tilde{\mu}_3^0(q_1, q_2, u_1, u_2, \cos(\bar{\mathbf{q}}_1 \mathbf{q}_2)=1|T^*)$ розрахована при абсолютному нулі температури при $u_1=u_2=0.5$.

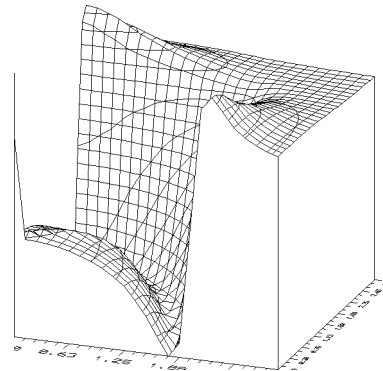


Рис. 12. Функція $f(q_1, q_2, u_1, u_2)$ при $u_1 = u_2 = 0.1$ розрахована на основі формули (2.42)

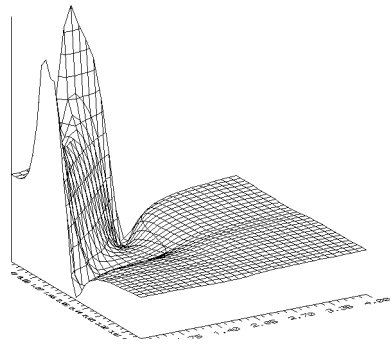


Рис. 13. Температурна поправка до $\delta\tilde{\mu}_3^0(q_1, q_2, u_1, u_2, \cos(\bar{\mathbf{q}}_1 \mathbf{q}_2)=1|T^*)$ розрахована чисельним методом при $u_1=u_2=0.12$.

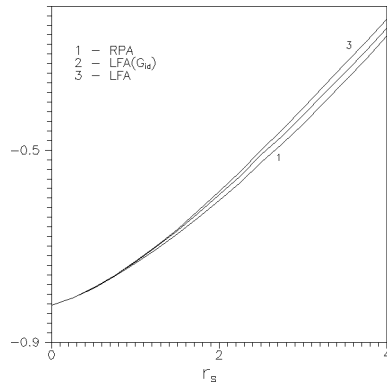


Рис. 14. Температурна поправка до хімічного потенціалу $\delta\mu(r_s|T^*)$ розрахована чисельним методом в різних наближеннях.

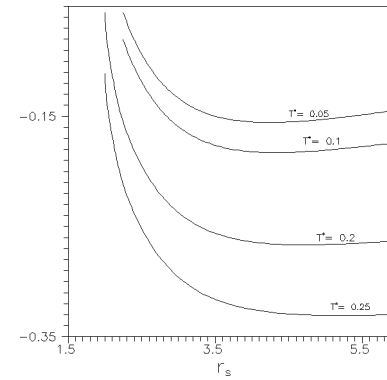


Рис. 15. Температурна поправка до вільної енергії $F[r_s]$ розрахована чисельним методом при різних температурах.

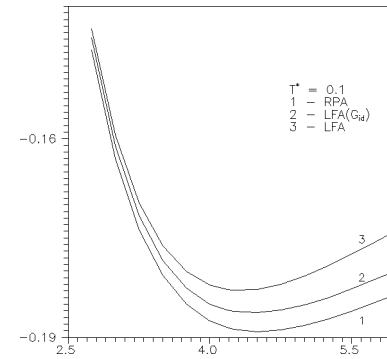


Рис. 16. Температурна поправка до вільної енергії $F[r_s]$ розрахована чисельним методом в різних наближеннях при температурі $T^*=0.2$.

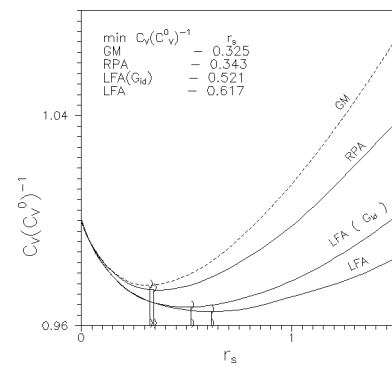


Рис. 17. Відносна теплоємність $\frac{C_V[r_s]}{C_V^0[r_s]}$ розрахована в різних наближеннях.

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Володимир Несторович Паславський

ДОСЛІДЖЕННЯ КОРЕЛЯЦІЙНИХ ФУНКЦІЙ МОДЕЛІ ІДЕАЛЬНОЇ
ФЕРМІ-СИСТЕМИ ПРИ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Роботу отримано 10 листопада 1999 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії модельних
спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені